

# РАСЧЕТ ХИМИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ В СИСТЕМАХ, СОДЕРЖАЩИХ ГЕПАРИН, ИОНЫ МЕТАЛЛОВ (ЦИНК (II), МАРГАНЕЦ (II)) И АМИНОКИСЛОТУ (ПРОЛИН)

*Крюков Т.В., Скобин М.И.*

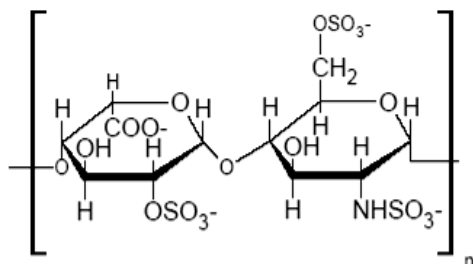
Тверской государственный университет

170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33

Гепарин – клинически востребованный эндогенный противосвертывающий препарат, по своей химической природе, относящийся к классу гликозамингликанов, мономерное звено которого образовано связанными в  $\alpha$ -(1 $\rightarrow$ 4) положении остатками L-идуроновой кислоты и D-гликозамина. Попадая в кровь при лечении сердечно-сосудистых заболеваний, гепарин способен образовывать комплексы с аминокислотами и ионами металлов, содержащимися в плазме.

В процессе репрезентативного, активного, планируемого эксперимента (рН-метрическое титрование) в модельных системах, соответствующих по значениям температуры (37°C), ионной силе (фоновый электролит 0,15 М NaCl) и интервалу изменения компонентов исследуемых растворов параметрам плазмы крови, было исследовано смешанно-лигандное комплексобразование в системах: ион металла (Zn(II), Mn(II)) - высокомолекулярный гепарин - аминокислота (пролин) в соотношении компонентов 1 : 1 : 1.

При выполнении работы учитывалось, что высокомолекулярный гепарин образует с ионами Zn(II), Mn(II) как монолигандные комплексы, так и смешаннолигандные (обуславливается рядом факторов: конформация полимерной цепи, стерические факторы), мономерное звено гепарина выступает в данном случае в качестве четырехдентатного лиганда.



Структурная формула мономерного дисахаридного звена гепарина.

При обработке кривых титрования тройных систем вида: ион металла – гепарин – аминокислота, при помощи метода математического моделирования химических равновесий (алгоритмы New DALSFKE,

AUTOEQUIL и HYPERQUAD 2008) были получены модели, включающие наиболее вероятные комплексные формы. Равновесия, формы и соответствующие им константы устойчивости представлены в таблице:

Равновесие	$\lg\beta$
$\text{Zn}^{2+} + \text{Hep}^{4-} + \text{Pro}^- \leftrightarrow \text{ZnHepPro}^{3-}$	$9.54 \pm 0.29$
$\text{Zn}^{2+} + \text{Hep}^{4-} + \text{H}^+ + \text{Pro}^- \leftrightarrow \text{ZnHepHPro}^{2-}$	$16.26 \pm 0.31$
$\text{Mn}^{2+} + \text{Hep}^{4-} + \text{H}^+ + \text{Pro}^- \leftrightarrow \text{MnHepHArg}^{2-}$	$17.76 \pm 0.11$

Результаты исследования сложных ион-молекулярных равновесий с участием катионов Zn(II), Mn(II) и полимерного биолиганда гепарина, а также аминокислоты (пролин) будут востребованы при создании баз данных экспертных систем, направленных на моделирование бионеорганических равновесий в плазме крови и других биологических жидкостях организма.

## ИОНОСЕЛЕКТИВНЫЕ ЭЛЕКТРОДЫ НА ОСНОВЕ $\text{Sr}_{4-x}\text{Cu}_x\text{Ta}_2\text{O}_9$

*Сайдмагомедова Я.С., Кадникова Е.Н., Штин С.А.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Одной из важнейших задач современной аналитической химии является количественное определение тяжелых металлов в различных объектах окружающей среды. Для контроля их содержания необходимы точные, чувствительные и экспрессные методы анализа. Такими качествами обладает метод потенциометрии с использованием ИСЭ.

На основе  $\text{Sr}_{4-x}\text{Cu}_x\text{Ta}_2\text{O}_9$  ( $x = 0,1; 0,2$ ), полученного методом твердофазного синтеза, изготовлены пленочные электроды с твердым контактом (инертные матрицы – полиметилметакрилат, полистирол, поливинилхлорид) и угольно-пастовые электроды (УПЭ) с различным процентным содержанием модификатора и углерода.